

修 士 論 文 の 和 文 要 旨

研究科・専攻	大学院 電気通信学研究科	量子・物質専攻	博士前期課程
氏 名	鈴木 雄大	学籍番号	0933025
論 文 題 目	122 系鉄系超伝導体におけるペアリング 対称性の多軌道模型解析		

要 旨

2008 年に鉄を含む化合物において高温超伝導体が発見され、大きな関心を集めてきた。理論的には最初に見つかった鉄系超伝導体である $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ (1111 系) に対して単位胞に 1 個の鉄原子を含み、5 つの 3d 軌道からなる模型の解析が行われた。一方、 $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$ をはじめとする 122 系と呼ばれる物質群は、多くの実験結果があるにもかかわらず、鉄原子 1 個のみを含む単位胞を取ることが厳密にはできないため、あまり理論研究は行われてこなかった。しかし 122 系物質 $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ と言う、超伝導ギャップにノードがあるにもかかわらず高い T_c を持つ物質が発見され、また同じく 122 系の KFe_2As_2 においても、磁束格子の実験から d 波の様な強い 4 回対称性を持たないギャップ対称性であるとされている等、1111 系に対する理論では説明がつかない 122 系特有の現象がいくつか見られている。

このような 122 系特有の物性をより詳しく見るために、今研究では、第一原理バンド計算から、最局在 Wannier 関数を用いてフェルミ面近傍の鉄の 3d 軌道由来のバンド構造を取り出すことで、単位胞内に 2 個の鉄原子を含む 10 軌道強束縛模型を構築し、これから図 1 のようにホッピングパラメーターを取り直すことによって、近似的な 3 次元 5 軌道模型を構築した。この様に求めた 10 軌道及び 5 軌道模型に乱雑位相近似を適用し、線形 Eliashberg 方程式を解くことによって、これらの物質においてどのような超伝導対称性が現れているのかを調べた。その結果、122 系においては、3 次元的な構造を持つフェルミ面の影響により、図 2 の様に超伝導ギャップに 3 次元的なノードが入る可能性を見いだした[1]。

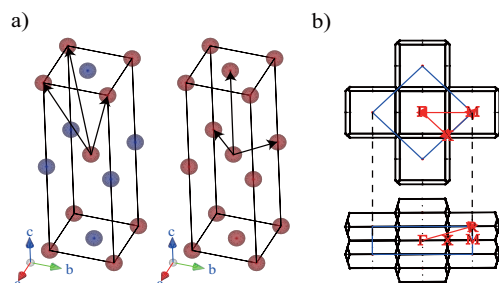


図 1: 122 系における 10 軌道から 5 軌道模型への変換概図(左)とブリルアンゾーンの対応(右)

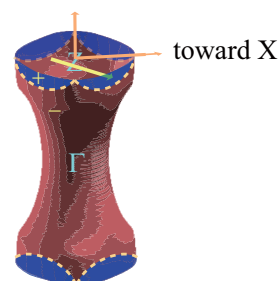


図 2: $\text{BaFe}(\text{As}_{0.36}\text{P}_{0.64})_2$ における 3 次元ノードの入ったギャップ構造

[1] K. Suzuki *et. al.* : J. Phys. Soc. Jpn **80**, 013710 (2011)